

Hinweise zur 4. Übung – Nichtlineare Regression und Partielle Korrelation

1.] a) Es seien $X_i \sim N(0,1)$ und $Y_i \sim N(0,1)$ unabhängige Zufallsgrößen. Wir bilden

$$W = aX + bY \quad \text{und} \quad V = a' X + b' Y.$$

Zeigen Sie, daß $\text{Cov}(V,W) = a a' + b b'$ ist.

b) Erzeugen Sie 1000 Zufallszahlen von V und W. Wählen Sie dabei a, a', b, b' so, daß gilt

$$(i) \quad \rho_{V,W} = 0,2 \quad \text{bzw.} \quad (ii) \quad \rho_{V,W} = 0,0.$$

a) Die Kovarianz zweier Zufallsvariabler ist

$$\text{Cov}(W,V) = E(WV) - EW EV = E((W - EW)(V - EV)).$$

Damit wird

$$\text{Cov}(W,V) = E(WV - WEV - VEW + EWEV).$$

Es ist $EX=0$, $EY=0$, $E(XY)=0$, (da X und Y unabhängig), $\text{Var} X=1$, und $\text{Var} Y=1$, also $EW=EV=0$ und

$$\begin{aligned} \text{Cov}(W,V) &= E((aX + bY)(a' X + b' Y)) = \\ &E(aa' X^2 + ba' XY + ab' YX + bb' Y^2) = \\ &aa' E(X^2) + (ab' + ba') E(XY) + bb' E(Y^2) = aa' + bb'. \end{aligned}$$

b) Der Fall (ii) ist theoretisch lösbar, wenn die beiden "Vektoren" W und V senkrecht aufeinander stehen: Die Parameter a, a', b, b' sind entsprechend wählbar, etwa $a = a' = 0.5\sqrt{2}$ und $b = b' = \pm 0.5\sqrt{2}$. (Da die Zufallsvariablen X und Y durch einen "praktischen" Zufallszahlengenerator bestimmt werden, sind sie nicht völlig unabhängig, also wird sich in der Lösung nicht exakt die Kovarianz 0 einstellen.)

Der Fall (i) ist aus der Gleichung für die Kovarianz bestimmbar. Der Korrelationskoeffizient ρ ist

$$\rho_{W,V} = \frac{\text{Cov}(W,V)}{\sigma_W \sigma_V} = \frac{aa' + bb'}{\sqrt{(a^2 + b^2)(a'^2 + b'^2)}}$$

Wird $\rho=0.2$ gesetzt, so können 3 Werte (a, b, a') gesetzt werden, und der vierte wird berechnet. Z.B. $a = a' = 0.5\sqrt{2}$, $b=1$, ergibt $b' = -0.3108$.

2.] Laden Sie die Datei HCN1.sav von D:. Die Werte sind experimentelle Resultate eines Spektrometers, mit welchem Vibrations-Rotationslinien des HCN-Moleküles gemessen wurden. Es wird aus theoretischen Betrachtungen geschlossen, daß einzelne Linien additiv überlagern, und die Bandenform mit der sogenannten Lorenz-Funktion beschrieben werden kann:

$$\text{basislinie} = \sum_i c_i \frac{a_i}{\left(\frac{a_i}{2}\right)^2 + (nr - b_i)^2}$$

Der Laufindex i gibt die Nummerierung der entsprechenden Linie an, und a_i, b_i, c_i sind für jede Linie zu findende Parameter: b_i sind die Lageparameter, c_i geben die Größe = Intensität der Linien an, und a_i beschreiben die sogenannte Halbwertsbreite. nr sei die Achsenvariable.

Inspektion der Daten im Streudiagramm oder Liniendiagramm zeigt, daß 3 Spektrallinien vorhanden sind. Um diese mit der angegebenen Funktion anzupassen, müssen die zu verwendenden Start-Parameter geraten werden. Als erstes die Basislinie: sie sollte etwa bei 0,975 sein. Die b_i sind die Lageparameter, sie geben die Linienmittelpunkte an: diese werden bei 56, 124 und 184 sein (aufsteigend mit nr). Die a_i sind die Halbwertsbreiten. Auch hier kann man direkt im Bild zu einer Näherung kommen, zu 10, 20, und 15. Verbleiben die Intensitätskoeffizienten c_1, c_2 , und c_3 . Offensichtlich ist etwa die Relation zwischen ihnen, die 8 zu 3 zu 1 sein sollte. Die wahren Größen ergeben sich (aus mehreren Tests über Versuch und Irrtum) zu 0.33, 3.4, und 1.0.

Zum Fit selbst klickt man an:

-- > Analysieren -- > Regression -- > Nichtlinear..., und kann im mittleren Fenster dann die Formel eintippen wie in der Aufgabe angegeben, wobei die Parameter in einem extra Fenster zu definieren und gleichzeitig numerisch zu belegen sind. (Achtung: Eigenartiges Verhalten des Systems zur Dezimaldarstellung: im Funktionenfenster gilt der american decimal point, aber im Parameterfenster das deutsche Dezimalkomma!!) Die Meßwerte-Variable, die die gesuchte Funktion ergeben soll, ist ins obere Kästchen als "Abh.Variable" zu schieben. Hier ist es die "Intensity", die Variable *intensit*. Folgendes Programm leistet auch diese Aufgabe (Hcn1.sps von D:):

```
NonLinear Regression.
\* Startwerte der Parameter *\
MODEL PROGRAM BALI=0.975
      A1=10  A2=20  A3=15
      B1=56  B2=124 B3=184
      C1=0.1 C2=1.0 C3=0.3 .
\* Fit-Funktion mit 10 Parametern *\
COMPUTE PRED_ = bali-c1*a1/(a1**2/4+(nr-b1)**2)-
                c2*a2/(a2**2/4+(nr-b2)**2)-
                c3*a3/(a3**2/4+(nr-b3)**2).
NLR intensit
  /PRED PRED_
  /SAVE PRED
  /CRITERIA SCONVERGENCE 1E-8 PCON 1E-8 .
EXECUTE .
```

Der nichtlineare Fit liefert die Iterationsschritte, und wenn alles nahe genug an der Lösung eingegeben ist, liefert der Fit auch ein konvergentes Resultat. Es zeigt sich, daß die Intensitäten c_i etwas zu gering geschätzt waren, aber der Fit konvergiert trotzdem!

(Aus dem Verlauf der Iteration kann eventuell auf falsche Startwerte der Parameter geschlossen werden. Wenn keine Konvergenz eintritt, hilft nur, das Modell immer weiter abzurüsten, bis der Fehler gefunden ist.)

Das Resultat kann verwendet werden, um die angepaßte Funktion grafisch mit den Daten zu vergleichen: Dazu mußte noch vor dem Fit im Fenster angeklickt werden, daß die Schätzung zu speichern ist. Die mit den gefitteten Parametern berechneten Funktionswerte stehen als $pred_1$ (oder mit weiteren Indizees bei mehreren Versuchen für die Rechnungen) in der Variablenliste und können vergleichend gezeichnet werden:

```
GRAPH
/LINE(MULTIPLE)= VALUE( intensit pred_1 ) BY nr .
EXECUTE .
```

Das Resultat für die Parameter steht unter "Estimate" wie folgt:

Parameter	Estimate	Asymptotic Std. Error	Asymptotic 95 % Confidence Interval	
			Lower	Upper
BALI	,984308167	,000925529	,982485194	,986131140
A1	15,003139309	,831807690	13,364765819	16,641512799
A2	23,034038216	,155127065	22,728491544	23,339584888
A3	17,170171547	,322216877	16,535515731	17,804827364
B1	55,838403476	,255047262	55,336048572	56,340758380
B2	124,03042063	,046765860	123,93830806	124,12253320
B3	184,22083959	,097742433	184,02832080	184,41335839
C1	,326143201	,014941219	,296714167	,355572236
C2	3,400817086	,019423380	3,362559745	3,439074426
C3	1,045279896	,016352100	1,013071914	1,077487878